ĐẠI HỌC BÁCH KHOA HÀ NỘI
VIỆN CÔNG NGHỆ THÔNG TIN VÀ TRUYỀN THÔNG

Huấn luyện mạng nơ-ron

(Phần 1)

Hà Nội, 10/2021

Nội dung

1. Hàm kích hoạt
2. Tiền xử lý dữ liệu
3. Khởi tạo trọng số
4. Các kỹ thuật chống học quá khớp
5. Làm giàu dữ liệu

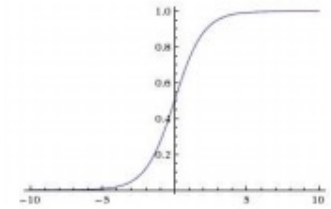
Hàm kích hoạt

Hàm kích hoạt

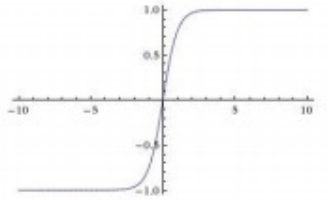
Activation Functions

Sigmoid

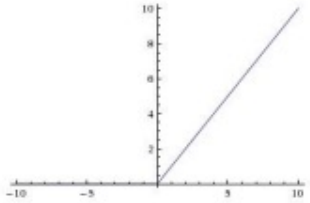
$$\sigma(x) = 1/(1+e^{-x})$$



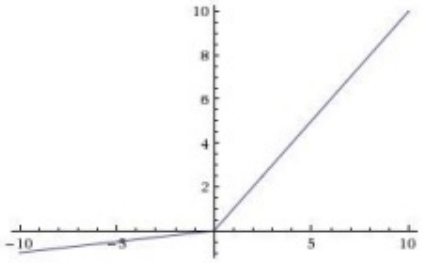
tanh tanh(x)



ReLU max(0,x)



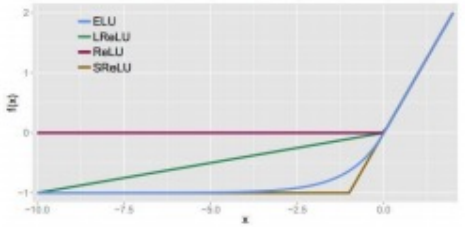
Leaky ReLU
max(0.1x, x)



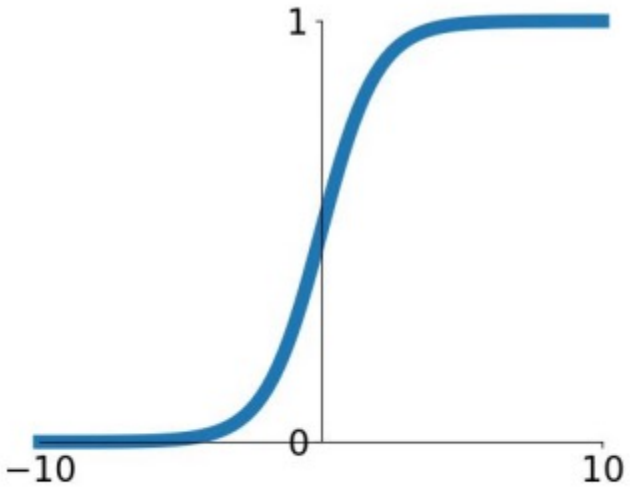
Maxout $\max(w_1^T x + b_1, w_2^T x + b_2)$

ELU

$$f(x) = \begin{cases} x & \text{if } x > 0 \\ \alpha\,(\exp(x) - 1) & \text{if } x \le 0 \end{cases}$$



Hàm kích hoạt



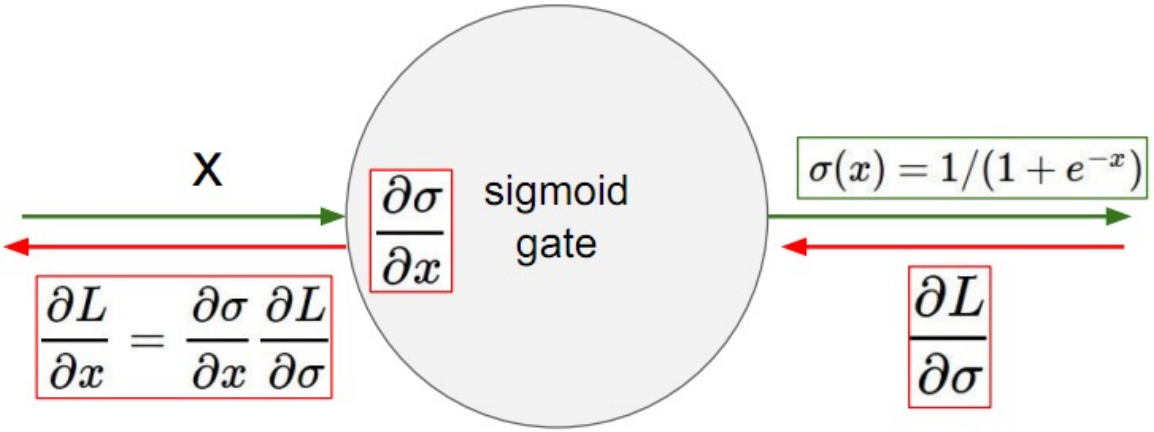
Sigmoid

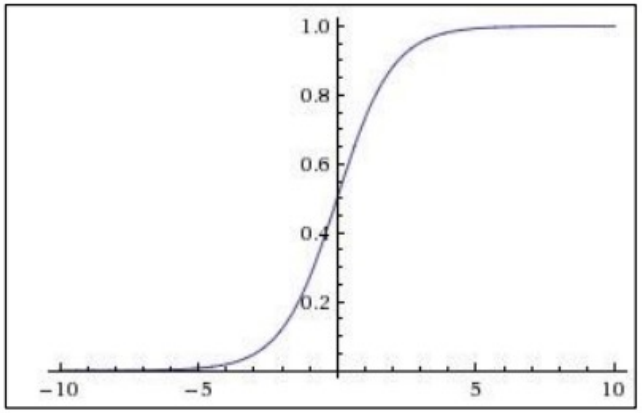
$$\sigma(x) = 1/(1 + e^{-x})$$

- Nhận giá trị trong khoảng [0,1]
- Được dùng phổ biến trong lịch sử mạng nơ-ron do chúng mô phỏng tốt tỉ lệ bắn xung (firing rate) của nơ-ron
- Có 3 nhược điểm:

- Nơ-ron bão hòa triệt tiêu gradient

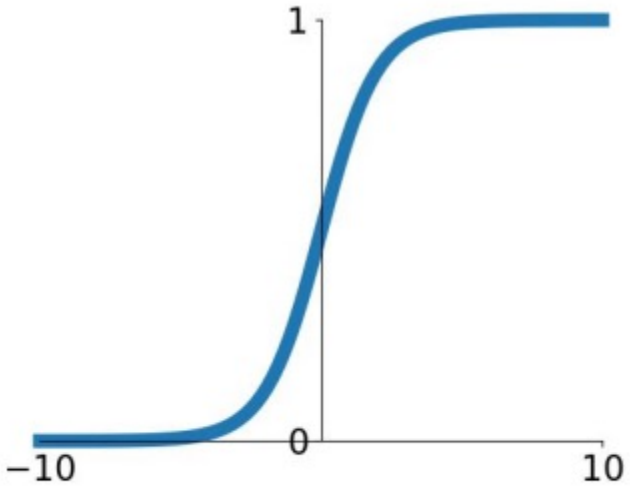
Hàm kích hoạt





- Điều gì sẽ xảy ra khi x = -10?
- Điều gì sẽ xảy ra khi x = 0?
- Điều gì sẽ xảy ra khi x = 10?

Hàm kích hoạt



Sigmoid

$$\sigma(x) = 1/(1 + e^{-x})$$

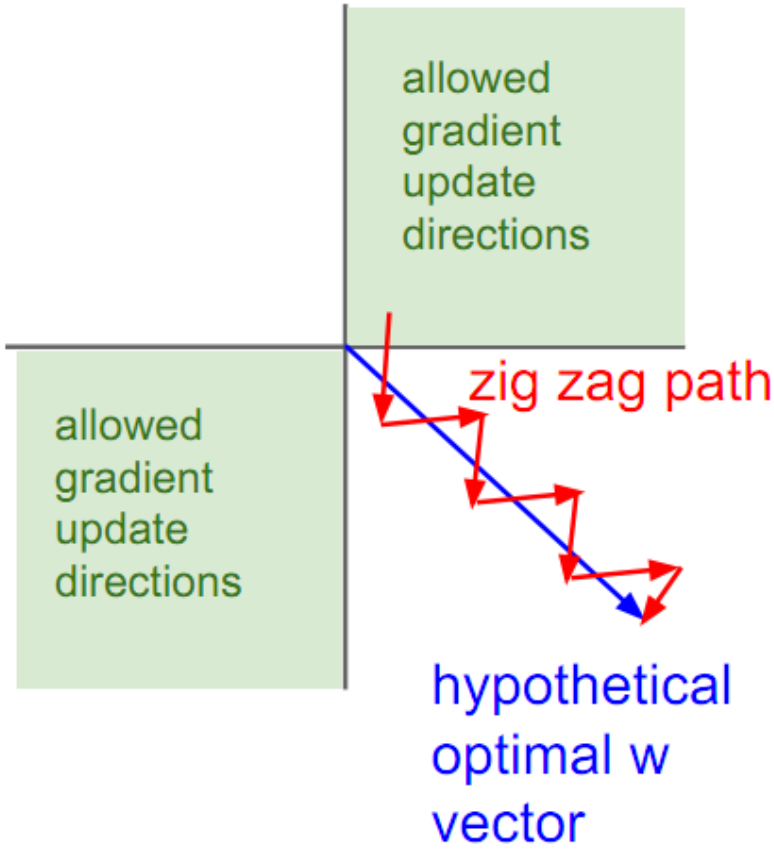
- Nhận giá trị trong khoảng [0,1]
- Được dùng phổ biến trong lịch sử mạng nơ-ron do chúng mô phỏng tốt tỉ lệ bắn xung (firing rate) của nơ-ron
- Có 3 nhược điểm:

- Nơ-ron bão hòa triệt tiêu gradient
- Trung bình đầu ra khác 0

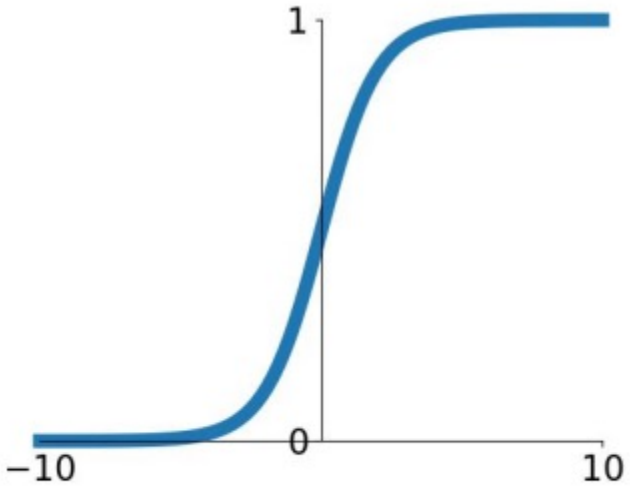
Hàm kích hoạt

$$f\left(\sum_i w_i x_i + b\right)$$

- Điều gì xảy ra nếu tất cả đầu vào x_i của nơ-ron đều dương?
- Khi đó gradient của hàm mục tiêu đối với **w** sẽ ra sao?
- Tất cả các phần tử của **w** đều cùng dấu với f'(**w**), tức là cùng âm hoặc cùng dương
- Khi đó gradient chỉ có thể hướng theo một số chiều nhất định trong không gian tìm kiếm



Hàm kích hoạt



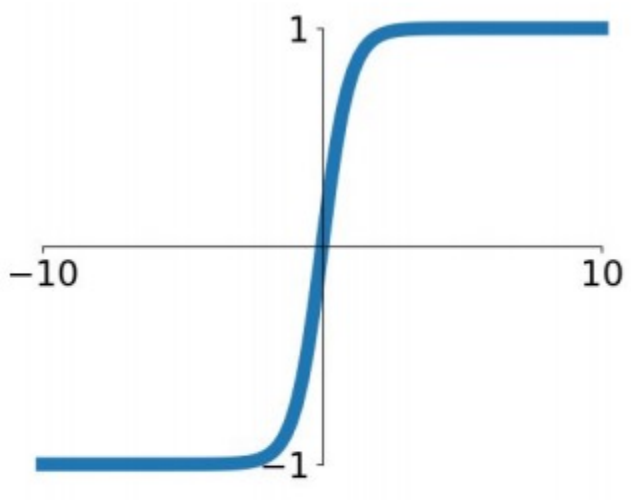
Sigmoid

$$\sigma(x) = 1/(1 + e^{-x})$$

- Nhận giá trị trong khoảng [0,1]
- Được dùng phổ biến trong lịch sử mạng nơ-ron do chúng mô phỏng tốt tỉ lệ bắn xung (firing rate) của nơ-ron
- Có 3 nhược điểm:

- Nơ-ron bão hòa triệt tiêu gradient
- Trung bình đầu ra khác 0
- Tính toán hàm mũ exp() tốn kém

Hàm kích hoạt

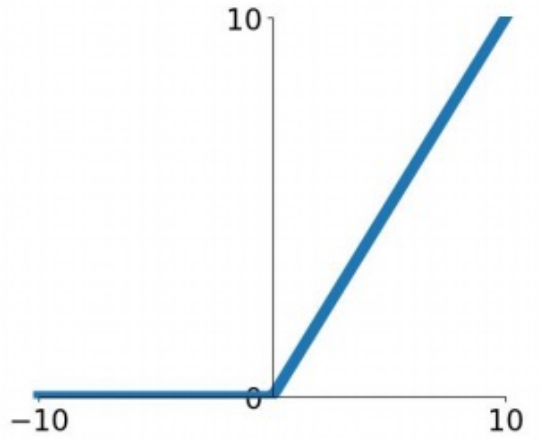


tanh(x)

$$\frac{e^{x} - e^{-x}}{e^{x} + e^{-x}}$$

- Nhận giá trị trong khoảng [-1,1]
- Trung bình đầu ra bằng 0
- Vẫn bị hiện tượng bão hòa, triệt tiêu gradient

Hàm kích hoạt



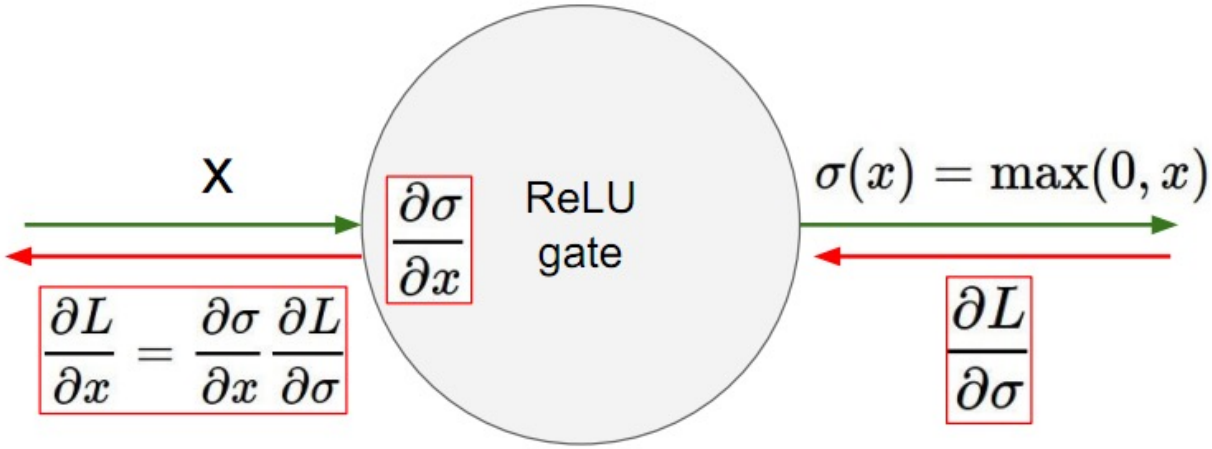
ReLU
(Rectified Linear Unit)

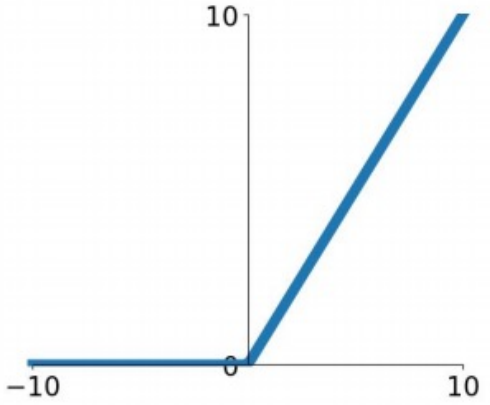
$$f(x) = \max(0,x)$$

- Không bị bão hòa trong vùng dương
- Tính toán hiệu quả
- Trong thực tế hội tụ nhanh hơn sigmoid/tanh (khoảng 6 lần)

- Đầu ra trung bình khác 0
- Và một vấn đề nữa...

Hàm kích hoạt





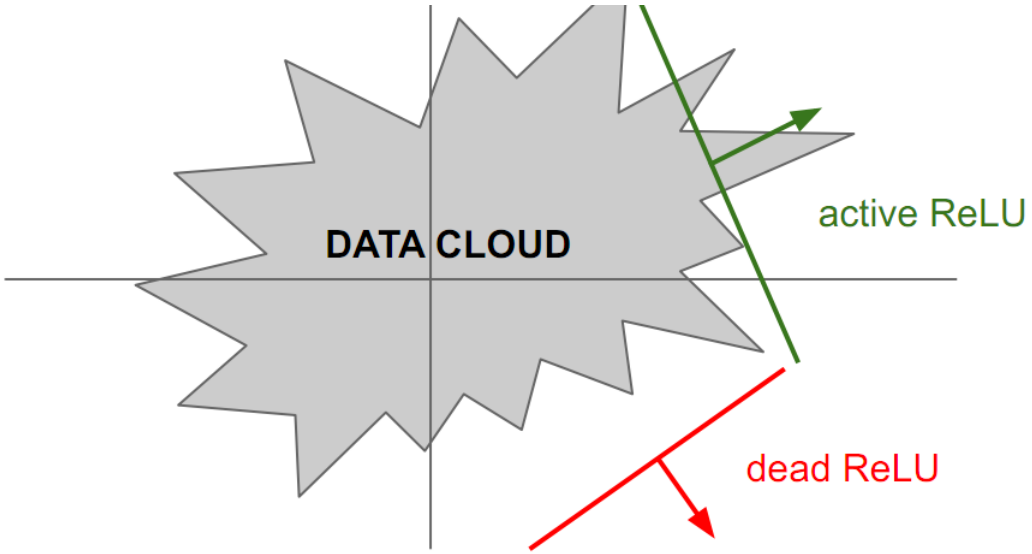
- Điều gì sẽ xảy ra khi x = -10?
- Điều gì sẽ xảy ra khi x = 0?
- Điều gì sẽ xảy ra khi x = 10?

Hàm kích hoạt

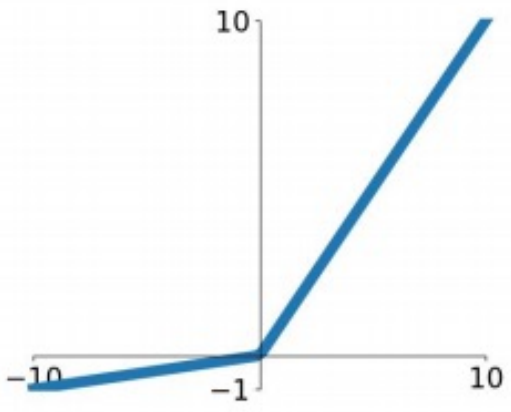
- ReLU bị "văng" ra khỏi tập dữ liệu dẫn tới đầu ra luôn âm và không bao giờ được cập nhật trọng số nữa

  ➔ ReLU chết

- Thường khởi tạo nơ-ron ReLU với bias dương bé (ví dụ 0.01)



Hàm kích hoạt

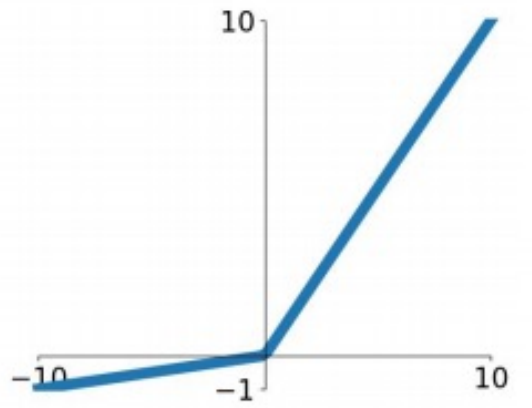


Leaky ReLU

$$f(x) = \max(0.01x, x)$$

- Không bị bão hòa trong vùng dương
- Tính toán hiệu quả
- Trong thực tế hội tụ nhanh hơn sigmoid/tanh (khoảng 6 lần)
- Không bao giờ "chết"

Hàm kích hoạt



- Không bị bão hòa trong vùng dương
- Tính toán hiệu quả
- Trong thực tế hội tụ nhanh hơn sigmoid/tanh (khoảng 6 lần)
- Không bao giờ "chết"

Leaky ReLU

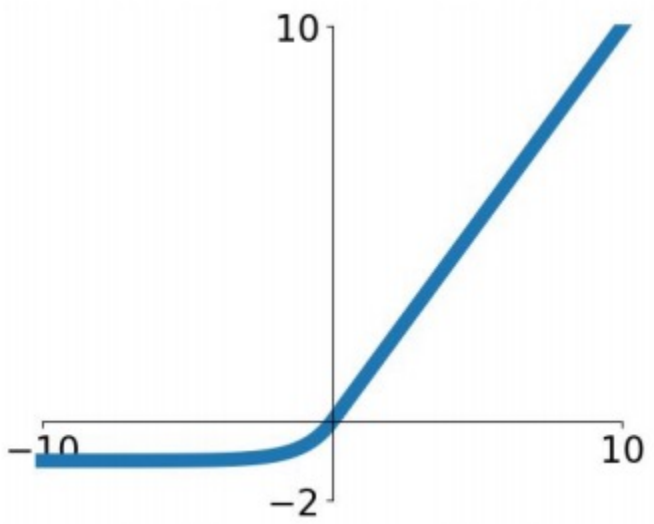
$$f(x) = \max(0.01x, x)$$

Parametric Rectifier (PReLU)

$$f(x) = \max(\alpha x, x)$$

backprop into \alpha (parameter)

Hàm kích hoạt ELU



- Có tất cả ưu điểm của ReLU
- Trung bình đầu ra gần 0 hơn
- Không "chết"

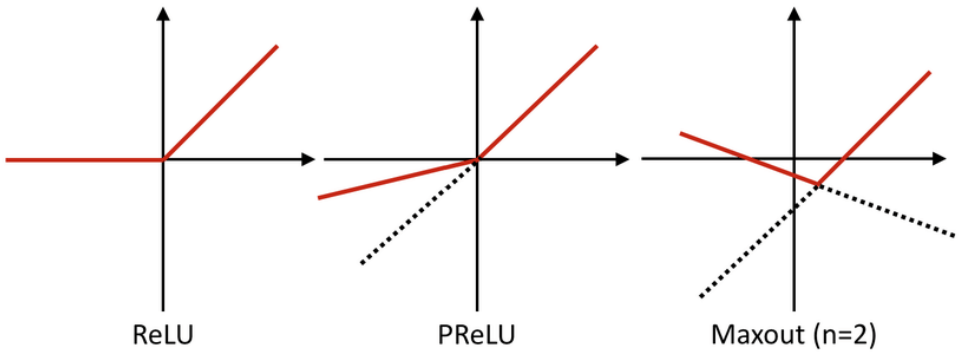
- Tính toán lâu do có hàm exp()

$$f(x) = \begin{cases} x & \text{if } x > 0 \\ \alpha\left(\exp(x) - 1\right) & \text{if } x \leq 0 \end{cases}$$

Hàm kích hoạt Maxout

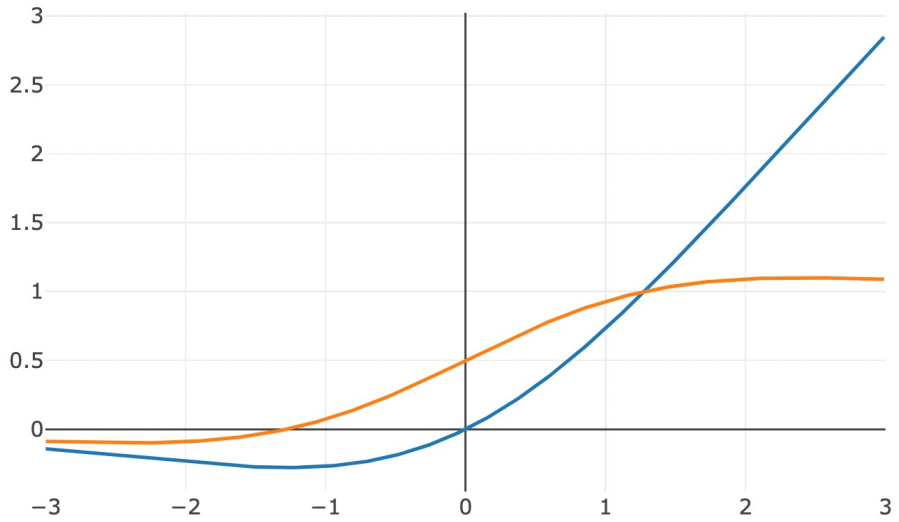
$$\max(w_1^T x + b_1, w_2^T x + b_2)$$

- Tổng quát hóa của ReLU và Leaky ReLU
- Tính toán tuyến tính
- Không bão hòa
- Không chết



- Gấp đôi số tham số mỗi nơ-ron

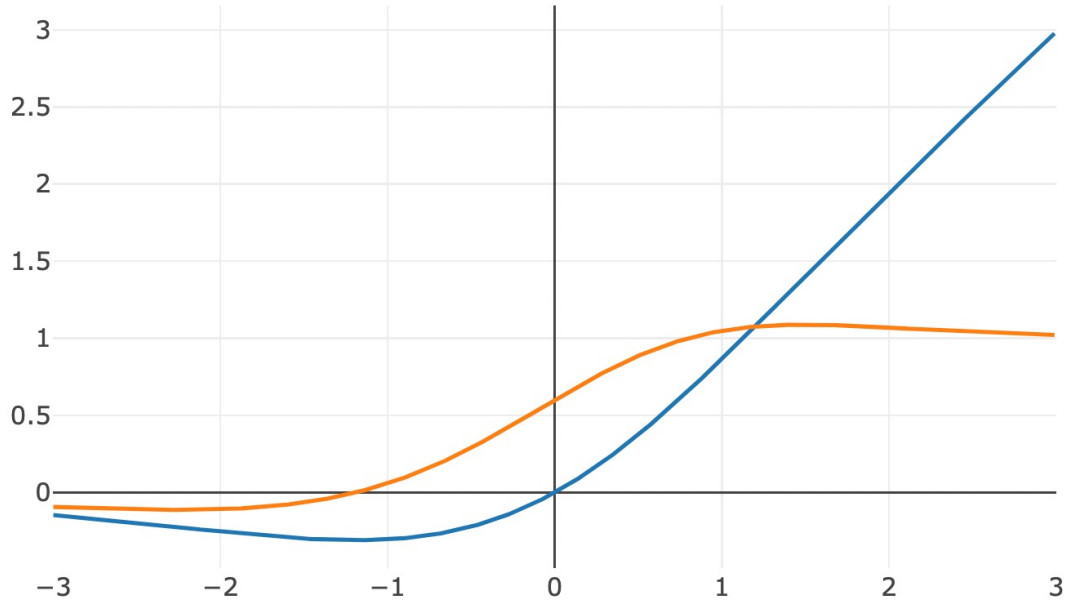
Hàm kích hoạt Swish



$$f(x, \beta) = \text{Swish}(x, \beta) = \frac{x}{1 + e^{-x\beta}}$$

- $\beta = 0$: tương đương hàm tuyến tính
- $\beta = \infty$: tương đương hàm ReLU
- Tương tự ReLU khi x > 0
- Hàm không đơn điệu khi x < 0
- Không bao giờ "chết"
- Đạo hàm liên tục
- Hàm mục tiêu trơn
- Hiệu quả hơn ReLU trong nhiều trường hợp, đặc biệt khi mạng rất sâu

Hàm kích hoạt Mish

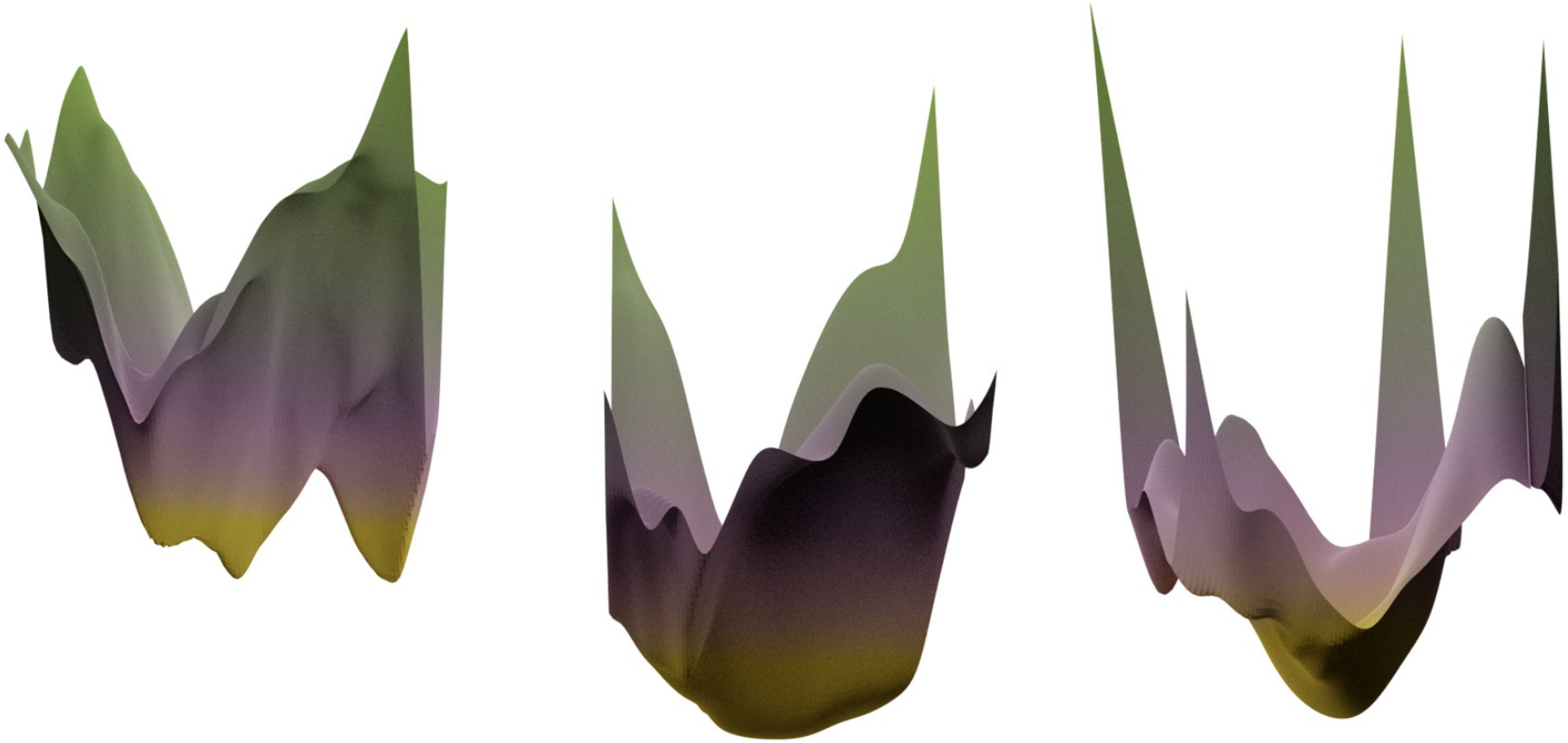


$$f(x) = \text{Mish}(x) = x \tanh\left(\ln\left(e^x + 1\right)\right)$$

- Tương tự ReLU khi x > 0
- Hàm không đơn điệu khi x < 0
- Không bao giờ "chết"
- Đạo hàm liên tục
- Hàm mục tiêu trơn
- Hiệu quả hơn ReLU và Swish trong nhiều trường hợp, đặc biệt khi mạng rất sâu

So sánh bề mặt hàm mục tiêu

- Từ trái sang phải: ReLU, Mish, Swish



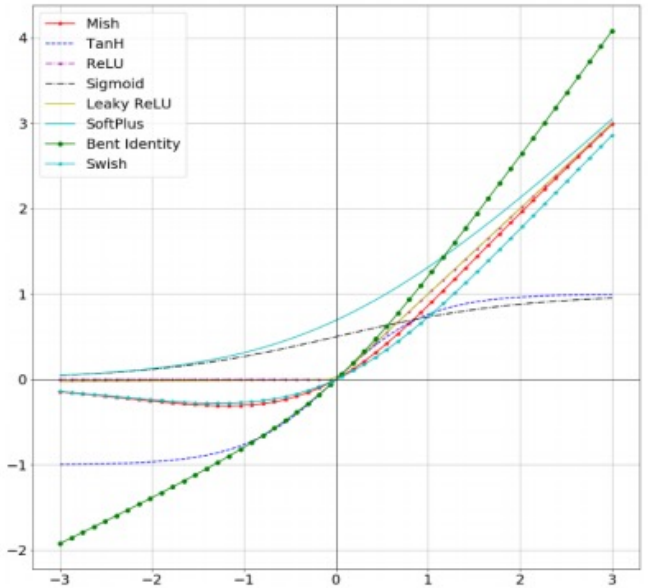
Hàm kích hoạt

- **Trong thực tế:**

- Thường dùng ReLU. Cẩn thận với tốc độ học để tránh ReLU bị chết.
- Có thể thử Leaky ReLU / Maxout / ELU
- Có thể thử Swish, Mish khi mạng rất sâu
- Có thể thử tanh nhưng không kỳ vọng nhiều
- Không dùng sigmoid

- Một số hàm kích hoạt khác:

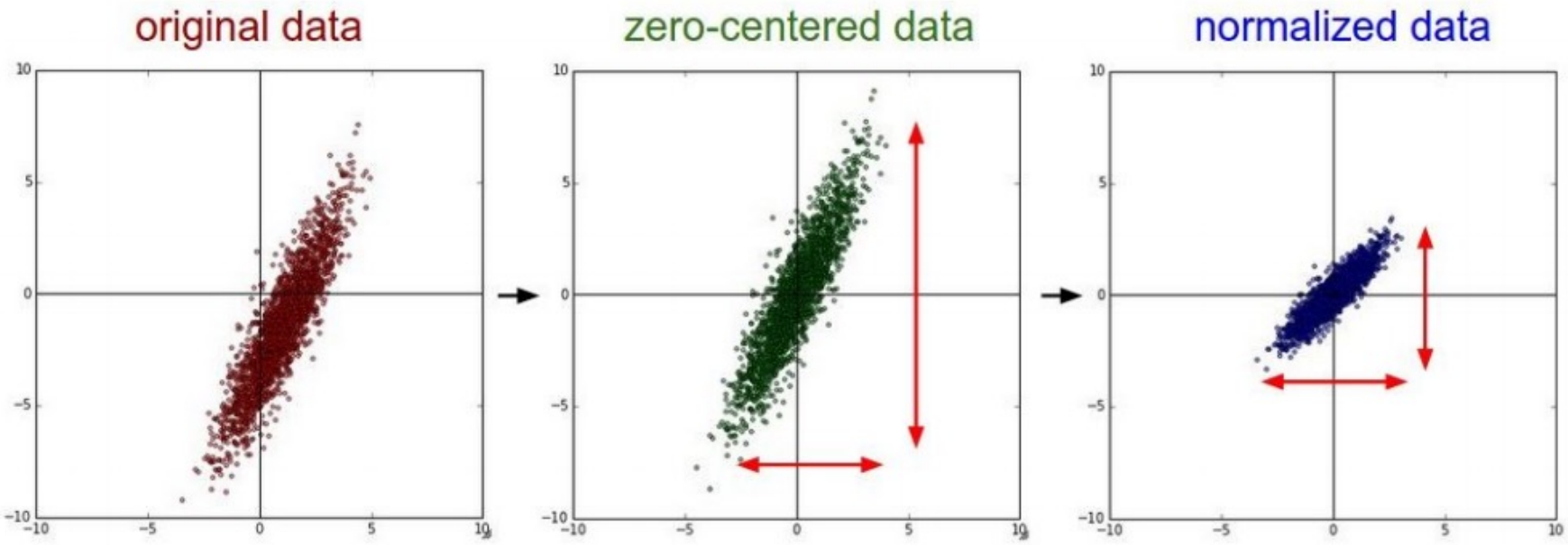
- ReLU6 = min(6, ReLU(x))
- SELU, GELU
- SoftPlus, RBF



Tiền xử lý dữ liệu

Tiền xử lý dữ liệu

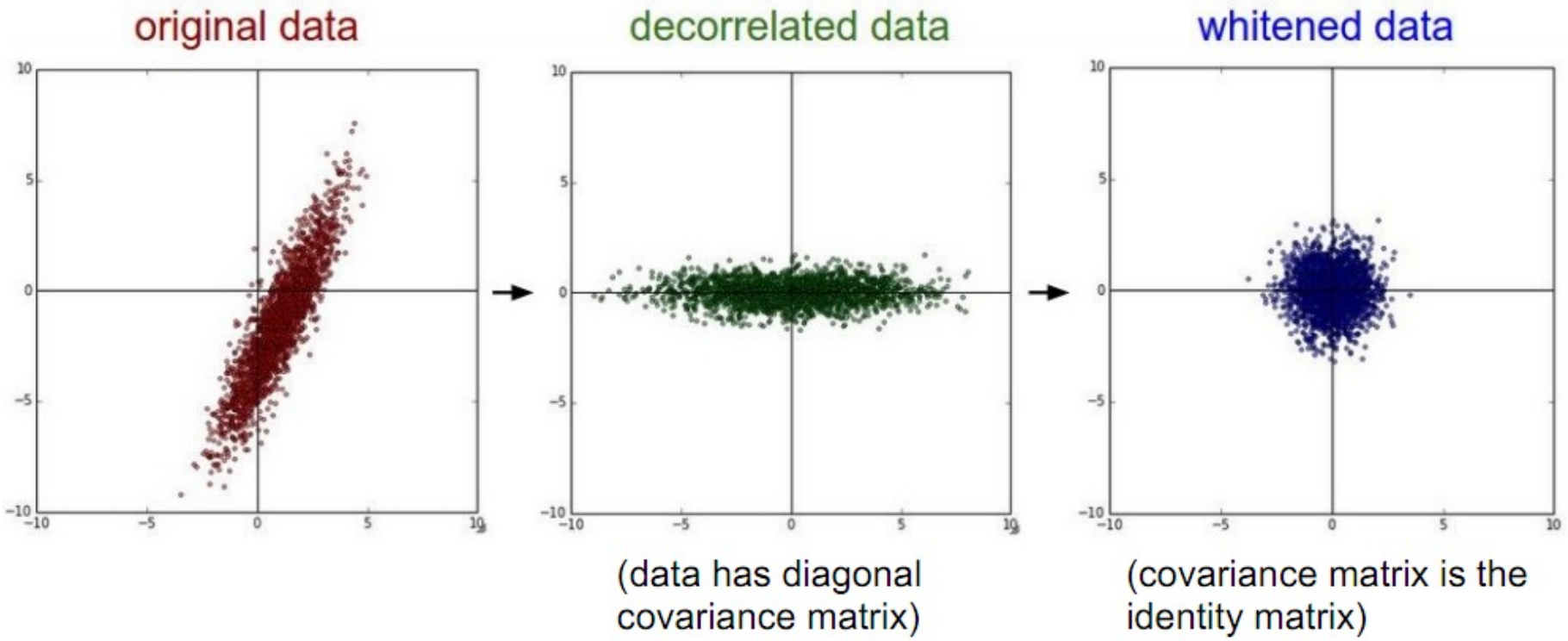
- Biến đổi phân phối dữ liệu về kỳ vọng bằng 0: trừ tất cả mẫu dữ liệu cho mẫu trung bình
- Biến đổi phân phối dữ liệu về độ lệch chuẩn đơn vị



Giả sử X [NxD] là ma trận dữ liệu, mỗi mẫu dữ liệu là một dòng

Tiền xử lý dữ liệu

- Trong thực tế có thể sử dụng PCA hoặc Whitening dữ liệu



Tiền xử lý dữ liệu

- Ví dụ với bộ CIFAR10 với các ảnh kích thước
- Subtract the mean image (e.g. AlexNet)
  (mean image = [32,32,3] array)
- Subtract per-channel mean (e.g. VGGNet)
  (mean along each channel = 3 numbers)
- Subtract per-channel mean and
  Divide by per-channel std (e.g. ResNet)
  (mean along each channel = 3 numbers)

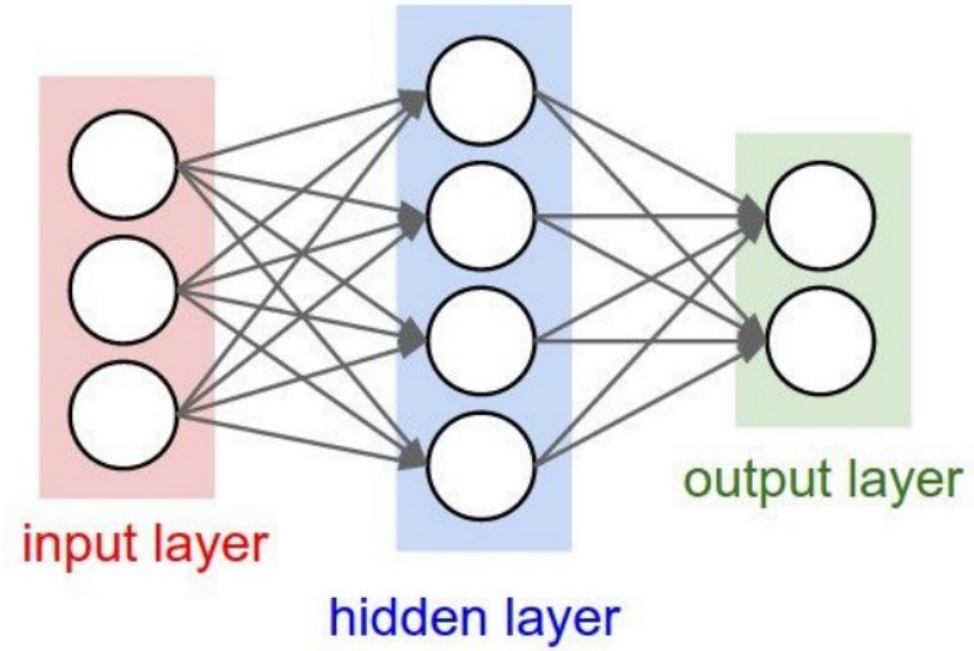
- Thường ít sử dụng PCA hoặc whitening

Khởi tạo trọng số

Khởi tạo trọng số

- Điều gì xảy ra nếu khởi tạo tất cả các trọng số bằng 0?

➔Không có ý nghĩa do tất cả các nơ-ron đều học và xử lý giống hệt nhau



Khởi tạo trọng số

- Ý tưởng thứ nhất: Khởi tạo ngẫu nhiên các giá trị nhỏ
  (Ví dụ theo phân bố chuẩn với kỳ vọng 0, độ lệch chuẩn 0.01)

```
W = 0.01 * np.random.randn(Din, Dout)
```

Làm việc ổn với các mạng nơ-ron nhỏ, nhưng có vấn đề với các mạng nơ-ron sâu hơn.

Khởi tạo trọng số

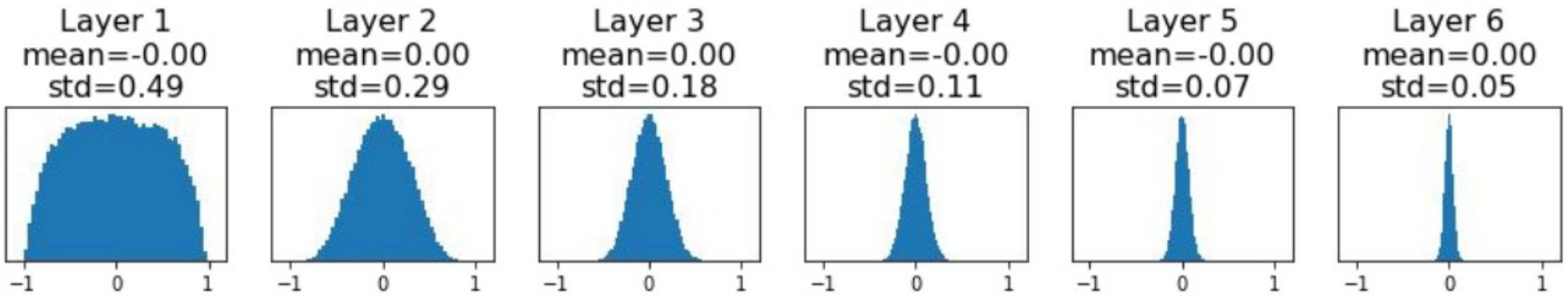
```
dims = [4096] * 7
hs = []
x = np.random.randn(16, dims[0])
for Din, Dout in zip(dims[:-1], dims[1:]):
    W = 0.01 * np.random.randn(Din, Dout)
    x = np.tanh(x.dot(W))
    hs.append(x)
```

Forward pass for a 6-layer net with hidden size 4096

All activations tend to zero for deeper network layers

Q: What do the gradients dL/dW look like?

A: All zero, no learning =(



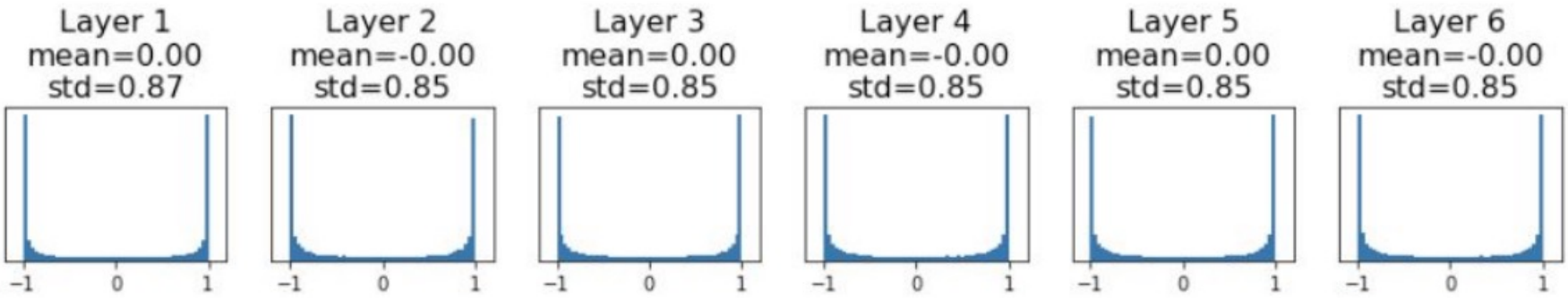
Khởi tạo trọng số

```
dims = [4096] * 7
hs = []
x = np.random.randn(16, dims[0])
for Din, Dout in zip(dims[:-1], dims[1:]):
    W = 0.05 * np.random.randn(Din, Dout)
    x = np.tanh(x.dot(W))
    hs.append(x)
```

Increase std of initial weights from 0.01 to 0.05

All activations saturate

Q: What do the gradients look like?

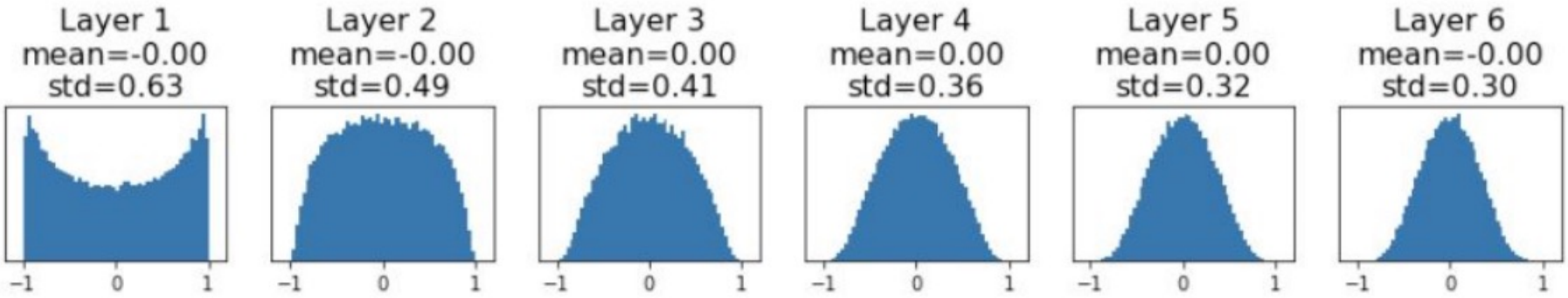


Khởi tạo trọng số Xavier

```
dims = [4096] * 7
hs = []
x = np.random.randn(16, dims[0])
for Din, Dout in zip(dims[:-1], dims[1:]):
    W = np.random.randn(Din, Dout) / np.sqrt(Din)
    x = np.tanh(x.dot(W))
    hs.append(x)
```

"Xavier" initialization:
std = 1/sqrt(Din)

"Just right": Activations are nicely scaled for all layers!



Khởi tạo trọng số Xavier

- Giả sử x và w là iid, độc lập nhau và trung bình bằng 0
- Tính toán theo chiều tiến forward:

$$var(y) = var(w_1x_1 + w_2x_2 + ... + w_{Nin}x_{Nin} + b)$$

$$var(w_ix_i) = E(x_i)^2 var(w_i) + E(w_i)^2 var(x_i) + var(w_i)var(x_i)$$

$$var(y) = N_{in} * var(w_i) * var(x_i)$$

$$N_{in} * var(w_i) = 1$$

$$var(w_i) = 1/ N_{in}$$

- Tương tự với luồng tín hiệu gradient backward:

$$var(w_i) = 1/ N_{out}$$

- Trung bình:

$$var(w_i) = 2/ (N_{in} + N_{out})$$

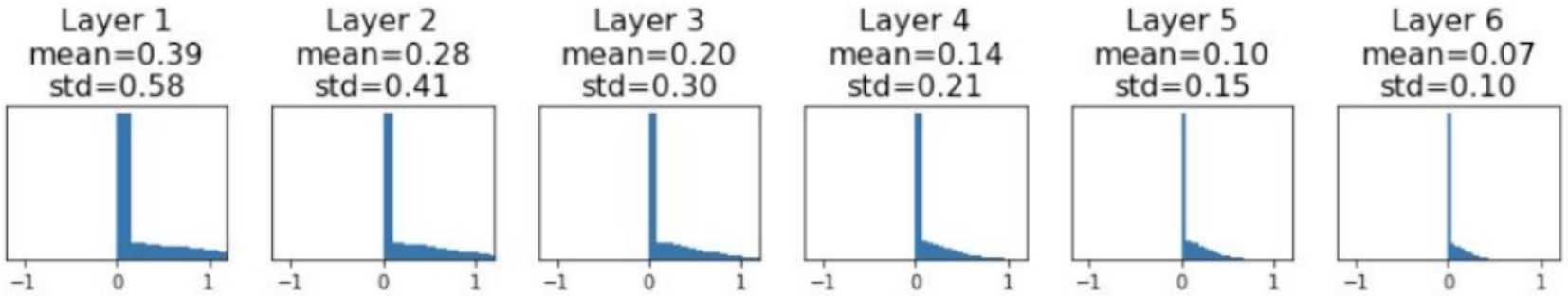
Khởi tạo trọng số: He initialization

```
dims = [4096] * 7
hs = []
x = np.random.randn(16, dims[0])
for Din, Dout in zip(dims[:-1], dims[1:]):
    W = np.random.randn(Din, Dout) / np.sqrt(Din)
    x = np.maximum(0, x.dot(W))
    hs.append(x)
```

Change from tanh to ReLU

Xavier assumes zero centered activation function

Activations collapse to zero again, no learning =(



$$var(y) = var(w_1x_1 + w_2x_2 + \ldots + w_{Nin}x_{Nin} + b)$$

$$var(y) = N_{in} /2 * var(w_i) * var(x_i)$$

$$N_{in} /2 * var(w_i) = 1$$

$$var(w_i) = 2/ N_{in}$$

Khởi tạo trọng số: He initialization

- Giả sử x và w là iid, độc lập nhau, w có trung bình bằng 0
- Tính toán theo chiều tiến forward:

$$\boldsymbol{y}_{l+1} = \boldsymbol{W}_l \boldsymbol{x}_l + \boldsymbol{b}_l$$

$$y_{l+1}^i = w_{l1}^i x_{l1} + w_{l1}^i x_{l2} + \cdots + w_{lN_l}^i x_{lN_l} + b, i = 1, \ldots, N_{l+1}$$

$$var(y_l) = N_l \times var(w_l x_l) \quad (1)$$

$$var(w_l x_l) = \left(E(x_l)\right)^2 var(w_l) + \left(E(w_l)\right)^2 var(x_l) +$$

$$var(w_l) var(x_l) = var(w_l)\left[var(x_l) + \left(E(x_l)\right)^2\right]$$

$$= var(w_l)\, E(x_l^2) \quad (2)$$

Khởi tạo trọng số: He initialization

- Do w_l phân bố đối xứng quanh 0, ta có thể chứng minh y_l cũng phân bố đối xứng quanh 0:

$$
\begin{aligned}
&Pr(w_l x_l > 0) \\
&= Pr((w_l > 0 \;\&\&\; x_l > 0) \;||\; (w_l < 0 \;\&\&\; x_l < 0)) \\
&= Pr(w_l > 0 \;\&\&\; x_l > 0) + Pr(w_l < 0 \;\&\&\; x_l < 0) \\
&= Pr(w_l > 0)\, Pr(x_l > 0) + Pr(w_l < 0)\, Pr(x_l < 0) \\
&= \frac{1}{2} Pr(x_l > 0) + \frac{1}{2} Pr(x_l < 0) = \frac{1}{2}
\end{aligned}
$$

Khởi tạo trọng số: He initialization

$$E\left(x_l^2\right) = E(max(0, y_{l-1})^2) = \frac{1}{2}E\left(y_{l-1}^2\right)$$

$$= \frac{1}{2}var(y_{l-1}) \qquad (3)$$

Từ (1), (2) và (3) ta có:

$$var(y_l) = \frac{1}{2}N_l var(w_l) var(y_{l-1})$$

Để phân bố y_l ổn định thì: $var(w_l) = \frac{2}{N_l}$

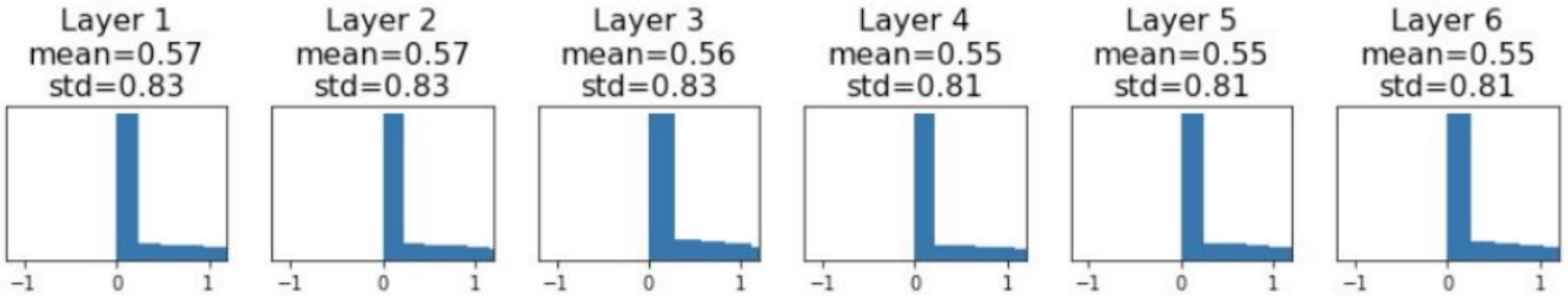
Khởi tạo trọng số: He initialization

- He / MSRA Initialization

```
dims = [4096] * 7
hs = []
x = np.random.randn(16, dims[0])
for Din, Dout in zip(dims[:-1], dims[1:]):
    W = np.random.randn(Din, Dout) * np.sqrt(2/Din)
    x = np.maximum(0, x.dot(W))
    hs.append(x)
```

ReLU correction: std = sqrt(2 / Din)

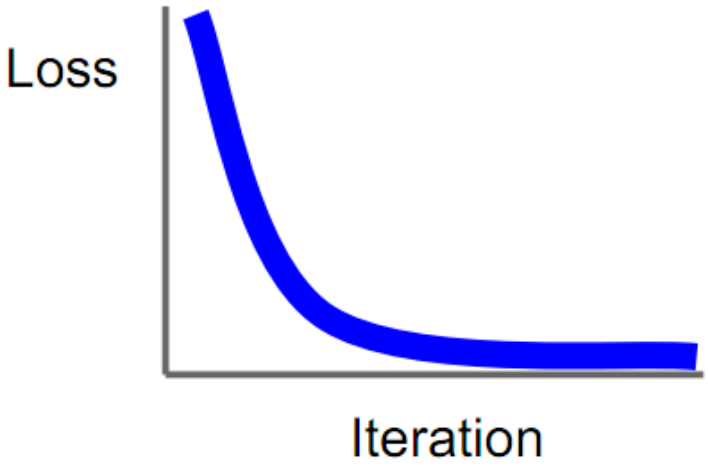
"Just right": Activations are nicely scaled for all layers!

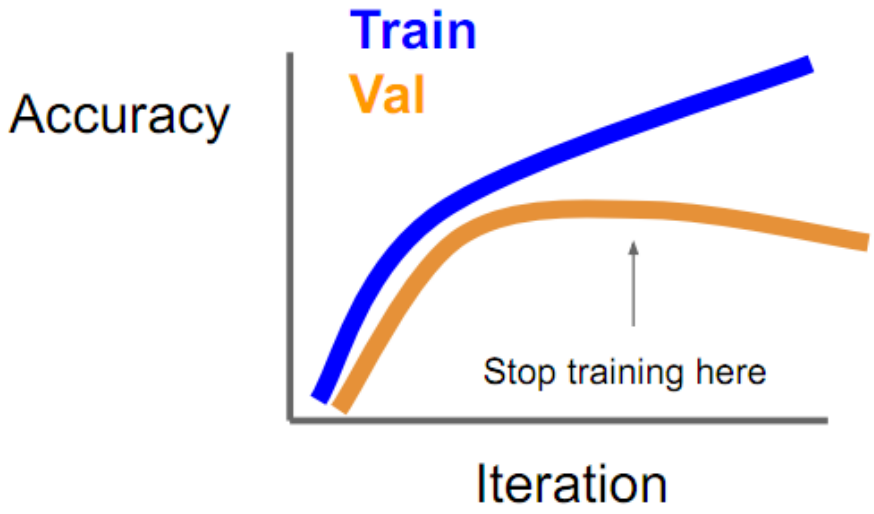


Một số kỹ thuật chống overfitting

Dừng sớm

- Dừng huấn luyện khi độ chính xác trên tập val bắt đầu giảm





Điều khiển quá trình huấn luyện

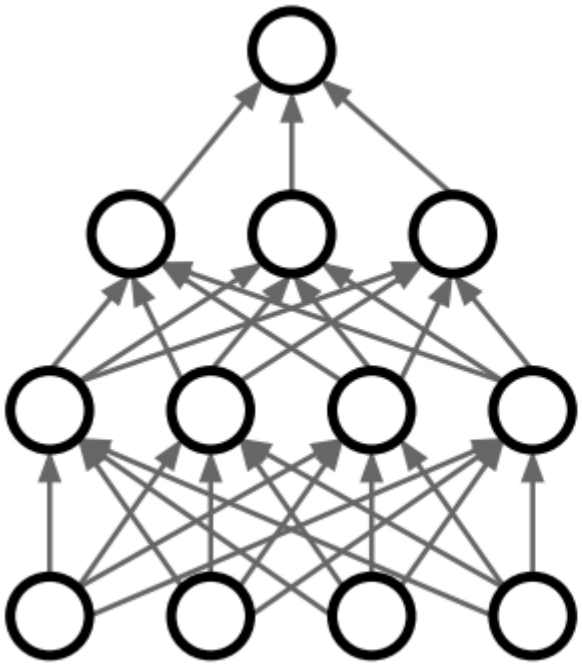
$$L = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq y_i}\max(0, f(x_i;W)_j - f(x_i;W)_{y_i} + 1) + \boxed{\lambda R(W)}$$

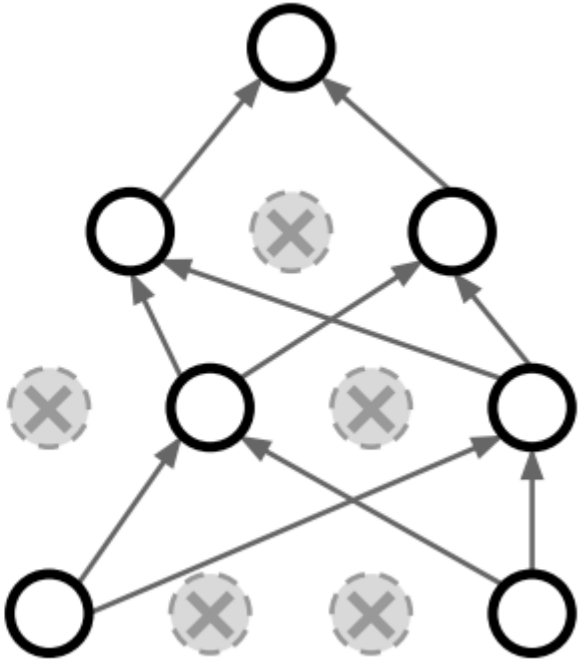
Một số ràng buộc hay sử dụng:

L2 regularization	$R(W) = \sum_k \sum_l W_{k,l}^2$	(Weight decay)
L1 regularization	$R(W) = \sum_k \sum_l \lvert W_{k,l}\rvert$	
Elastic net (L1 + L2)	$R(W) = \sum_k \sum_l \beta W_{k,l}^2 + \lvert W_{k,l}\rvert$	

Dropout

- Trong quá trình tính toán tiến (forward pass), ngẫu nhiên thiết lập đầu ra một số nơ-ron về 0.
- Xác suất drop thường là 0.5





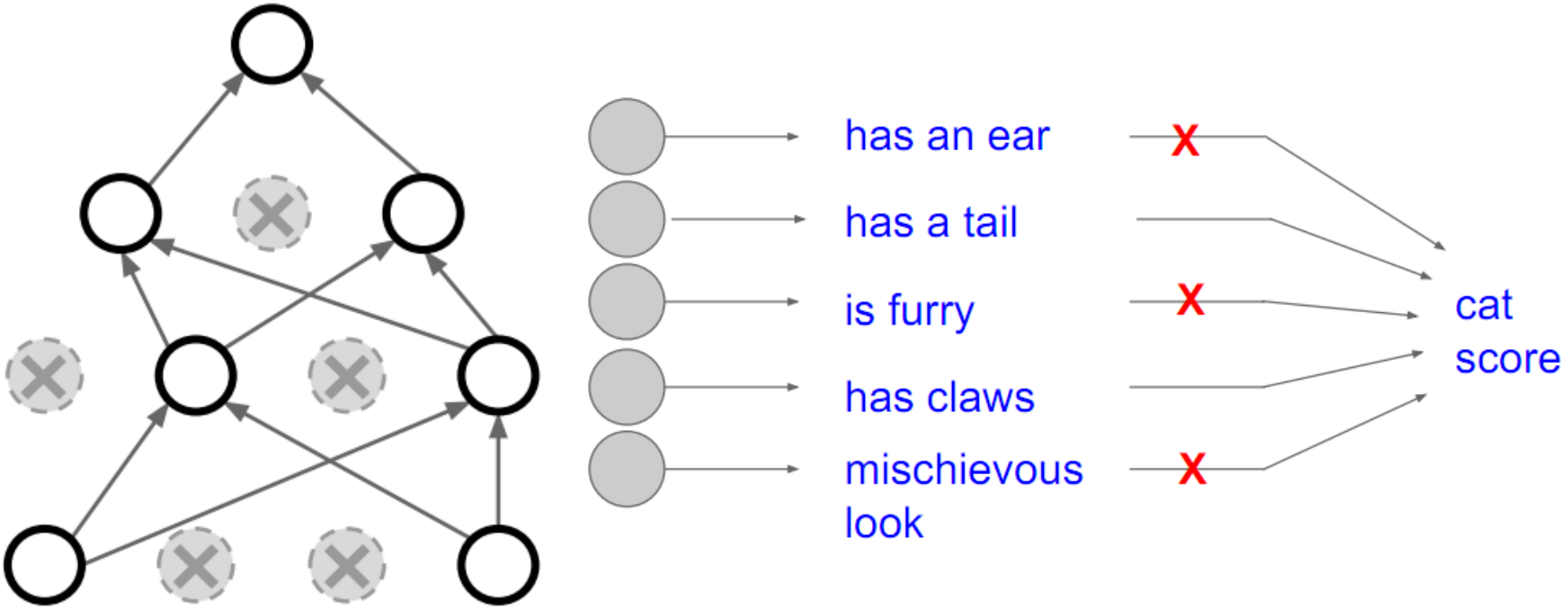
Dropout

- Ví dụ quá trình tính toán tiến của một mạng nơ-ron 3 lớp sử dụng dropout

```
p = 0.5 # probability of keeping a unit active. higher = less dropout

def train_step(X):
  """ X contains the data """

  # forward pass for example 3-layer neural network
  H1 = np.maximum(0, np.dot(W1, X) + b1)
  U1 = np.random.rand(*H1.shape) < p # first dropout mask
  H1 *= U1 # drop!
  H2 = np.maximum(0, np.dot(W2, H1) + b2)
  U2 = np.random.rand(*H2.shape) < p # second dropout mask
  H2 *= U2 # drop!
  out = np.dot(W3, H2) + b3

  # backward pass: compute gradients... (not shown)
  # perform parameter update... (not shown)
```

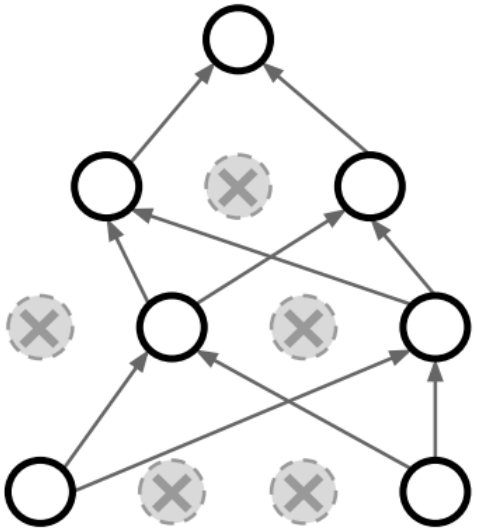
Tác dụng dropout

- Ép mạng nơ-ron phải học biểu diễn dư thừa (redundant representation)



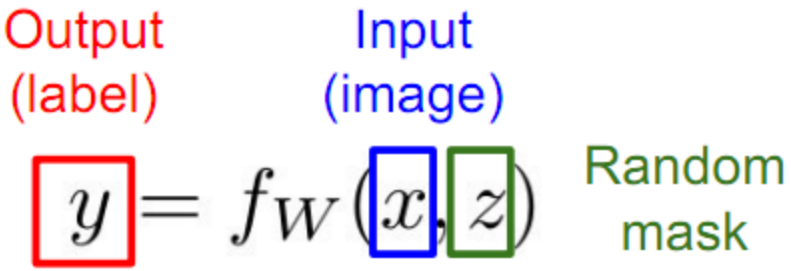
Tác dụng dropout

- Dropout khi huấn luyện có thể diễn giải như huấn luyện đồng thời nhiều mô hình khác nhau
- Mỗi kiểu drop nơ-ron tương ứng với một mô hình
- Một lớp kết nối đầy đủ với 4096 nơ-ron sẽ có 2^{4096} ~ 10^{1233} phương án drop
- … chỉ có cỡ 10^{82} nguyên tử trong toàn bộ vũ trụ!



Lúc suy diễn

- Dropout làm kết quả đầu ra ngẫu nhiên
-



- Cần phải lấy trung bình tất cả các kết quả

$$y = f(x) = E_z\left[f(x,z)\right] = \int p(z) f(x,z) dz$$

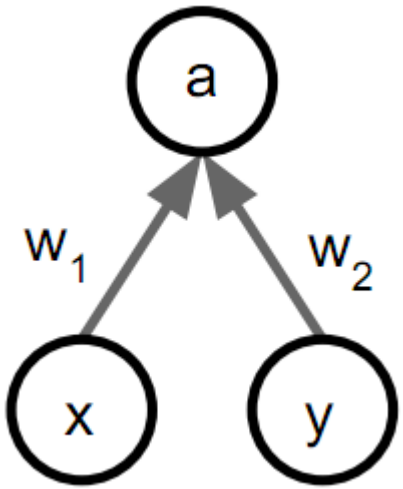
- Nhưng tính tích phân này là không thể…

Lúc suy diễn

- Xấp xỉ tích phân

$$y = f(x) = E_z\big[f(x,z)\big] = \int p(z) f(x,z) dz$$

- Ví dụ xét một nơ-ron



- Lúc suy diễn: $E\big[a\big] = w_1 x + w_2 y$
- Lúc huấn luyện:

$$\begin{aligned} E\big[a\big] =& \frac{1}{4}(w_1 x + w_2 y) + \frac{1}{4}(w_1 x + 0y) \\ &+ \frac{1}{4}(0x + 0y) + \frac{1}{4}(0x + w_2 y) \\ =& \frac{1}{2}(w_1 x + w_2 y) \end{aligned}$$

Lúc suy diễn

- Lúc suy diễn tất cả nơ-ron đều hoạt động. Vì vậy phải scale đầu ra của mỗi nơ-ron:

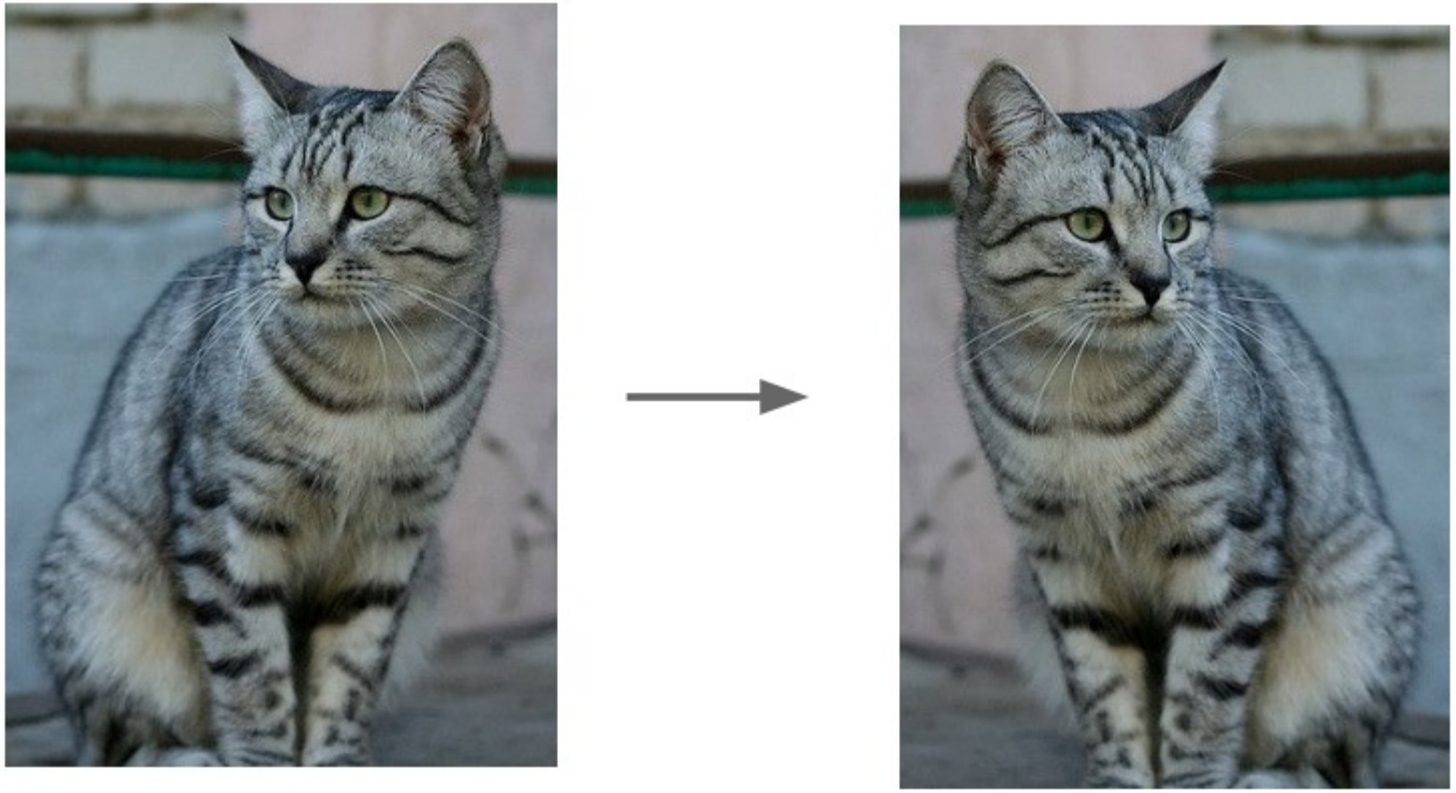
Đầu ra khi suy diễn = kỳ vọng đầu ra khi huấn luyện

➔ Nhân với tỉ lệ keeping rate

```
def predict(X):
  # ensembled forward pass
  H1 = np.maximum(0, np.dot(W1, X) + b1) * p # NOTE: scale the activations
  H2 = np.maximum(0, np.dot(W2, H1) + b2) * p # NOTE: scale the activations
  out = np.dot(W3, H2) + b3
```

Làm giàu dữ liệu
Data Augmentation

Flip ngang



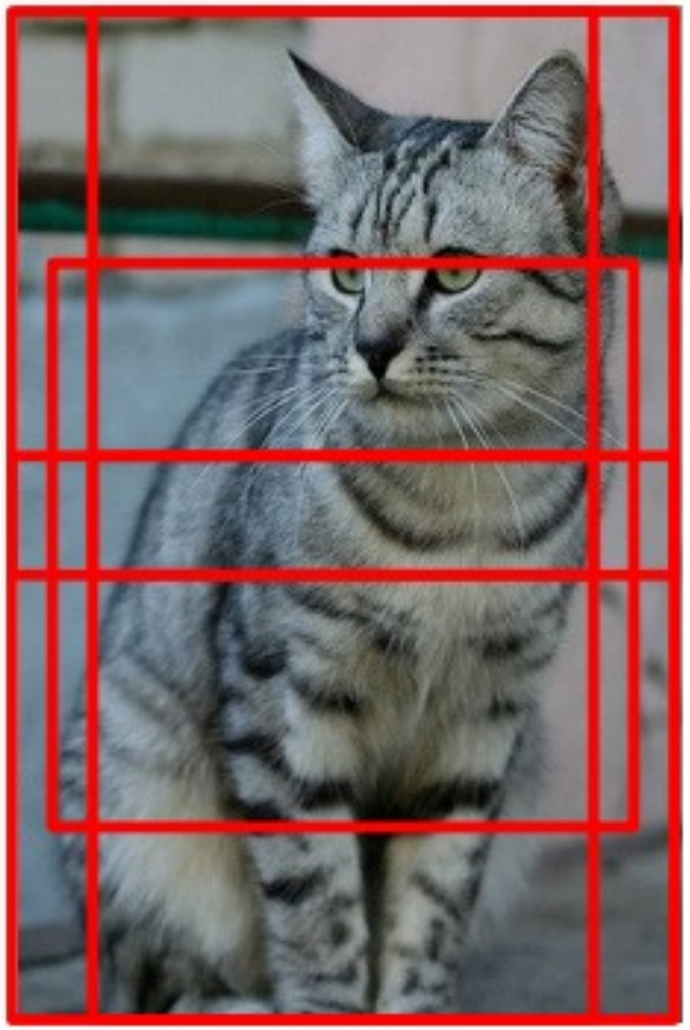
Crop ngẫu nhiên và scale ảnh

- Ví dụ ResNet:

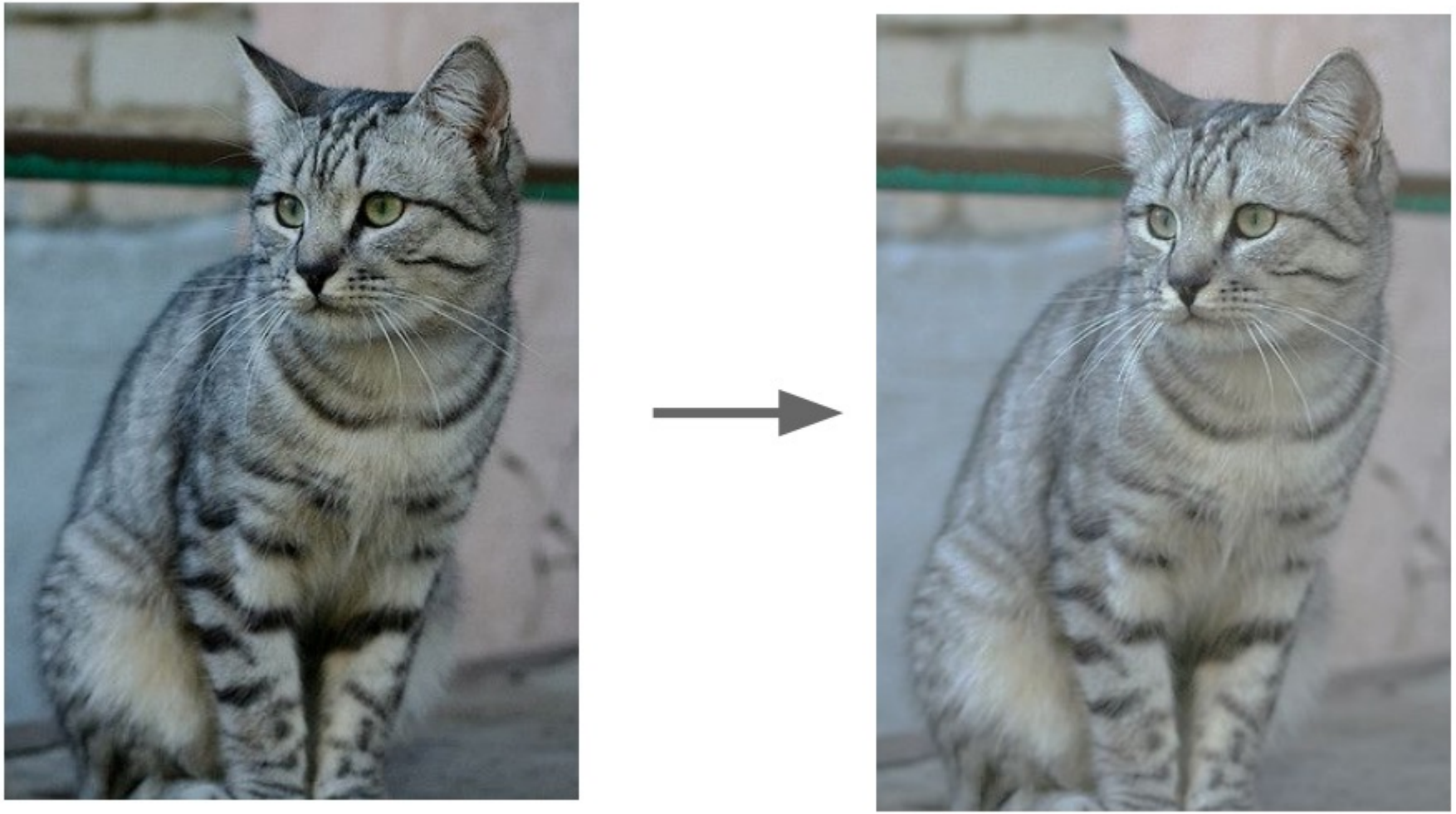
1. Chọn ngẫu nhiên L trong khoảng [256, 480]

2. Resize ảnh để chiều nhỏ nhất bằng L

3. Crop ngẫu nhiên vùng kích thước 224 x 224



Thay đổi màu sắc



Các phép biến đổi khác…

- Tịnh tiến
- Xoay ảnh
- stretching
- shearing
- lens distortions…

Mixup

CNN

Target label:
cat: 0.4
dog: 0.6

Randomly blend the pixels of pairs of training images, e.g. 40% cat, 60% dog

Một số thư viện

1. Albumentations

https://github.com/albumentations-team/albumentations

2. Imgaug

https://github.com/aleju/imgaug

3. Augmentor

https://github.com/mdbloice/Augmentor

Data augmentation in NLP

- Back translation
- EDA (Easy Data Augmentation)
- NLP Albumentation
- NLP Aug

Tài liệu tham khảo

1. Bài giảng biên soạn dựa trên khóa cs231n của Stanford, bài giảng số 7-8:

http://cs231n.stanford.edu

2. Khởi tạo Xavier:
https://prateekvjoshi.com/2016/03/29/understanding-xavier-initialization-in-deep-neural-networks/

ĐẠI HỌC BÁCH KHOA

25 YEARS ANNIVERSARY SOICT

VIỆN CÔNG NGHỆ THÔNG TIN VÀ TRUYỀN THÔNG

SCHOOL OF INFORMATION AND COMMUNICATION TECHNOLOGY

Thank you for your attentions!

soict.hust.edu.vn/ fb.com/groups/soict